Molécules polyatomiques

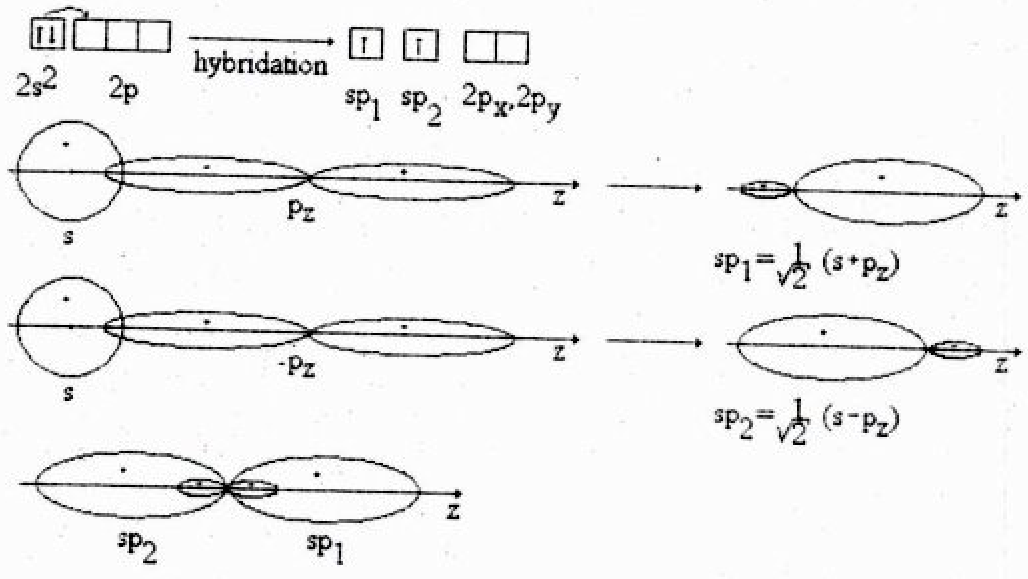
Géométrie des molécules

I- Théorie de l'hybridation

Dans certains cas la théorie des OM ne permet pas d'expliquer des observations expérimentales tel que la géométrie des molécules ou les valeurs des angles de liaisons. Pour cela on a introduit la théorie de l'hybridation pour mettre en accord la géométrie moléculaire avec la méthode CLOA-OM. Cette théorie consiste à transformer les OA de l'atome central en OA hybrides, qui auront la même symétrie que cette molécule. L'OA hybride d'un atome est la combinaison linéaire de ses OA.

I- 1- hybridation sp(digonale)

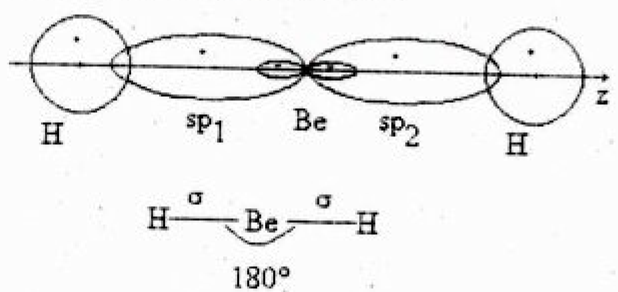
Les OA d'un atome de la 2[ème] période sont : 2s, $2p_x$, $2p_y$,$2p_z$. A partir des 2 OA s et p_z on obtient 2 OA hybrides linéaires sp_1 et sp_2. Les OA $2p_x$ et $2p_y$ restent inchangées et gardent leurs caractères purs.



Exemple : BeH_2, C_2H_2, HCN,...

<u>BeH_2 :</u>

Be(z=4) : $1s^2 2s^2 2p^0$; hybridation sp, les 2 OA hybrides se recouvrent avec l'OA 1s de H pour donner une molécule linéaire :

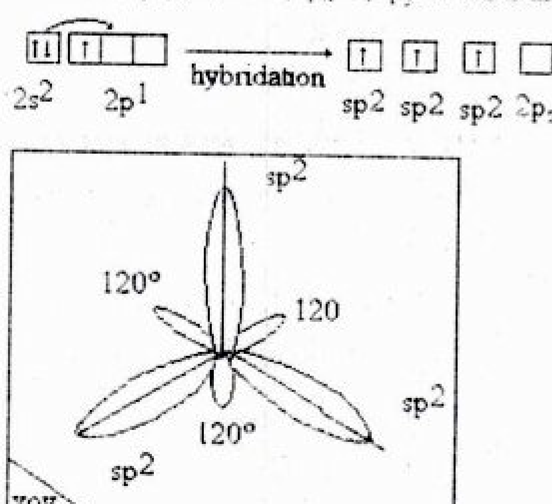


$$H \overset{\sigma}{—} Be \overset{\sigma}{—} H$$

180°

I- 2- hybridation sp^2(trigonale)

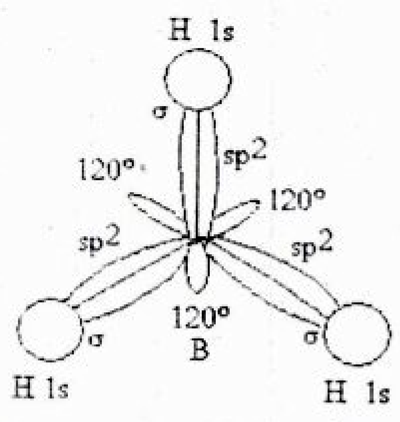
Cette hybridation conduit à des molécules trigonales planes, dans lesquelles l'atome central est lié à 3 atomes dirigés vers les sommets d'un triangle équilatéral. Il faut donc 3 OA hybrides coplanaires, faisant entre elles un angle de 120°, pour se recouvrir avec des atomes voisins. L'OA hybride sp^2 est la combinaison linéaire de 2 OA $2p_x$ et $2p_y$ avec une OA 1s : $(sp^2)_i = a_i 1s + b_i 2p_x + c_i 2p_y$. Il reste alors une OA p_z pur.



Exemple : BH_3, BF_3, BCl_3, C2H4,…

<u>BH_3 :</u>

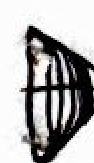
B(z=5) : $1s^2 2s^2 2p^1$; hybridation sp^2, le recouvrement des 3 OA hybrides du B avec l'OA 1s des 3 H conduit à une molécule plane :



I- 3- hybridation sp^3(tetraedrique ou tetragonale)

Elle conduit à des molécules à symétrie tetraedrique. Elle consiste à adapter les OA de valence des atomes à la géométrie et à la symétrie de ces molécules, c'est à dire au tetraedre. Les OA hybrides sp^3 sont obtenues par la combinaison linéaire des 4 OA 2s, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$. Elles pointent vers les sommets d'un tetraedre, faisant entre elles des angles de 109,28° .

Exemple : CH_4, SiH_4, NH_3, H_2O,…



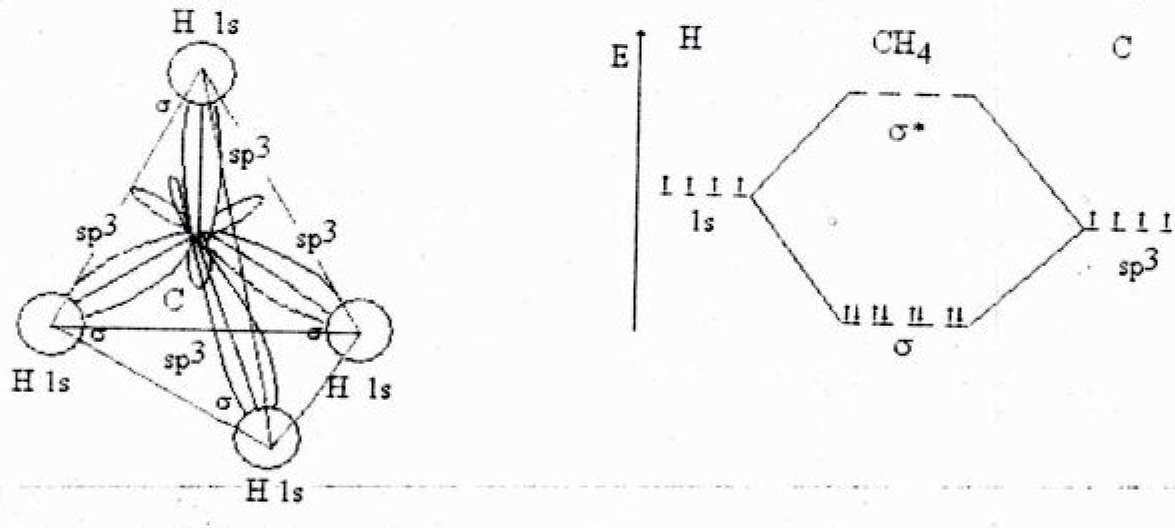
CH$_4$(le méthane) :

L'angle de liaison dans cette molécule ne peut pas être expliqué par le diagramme de Lewis. En envisageant l'hybridation sp^3 pour l'atome de carbone, l'accord avec l'expérience devient acceptable.

H
H–C–H
H

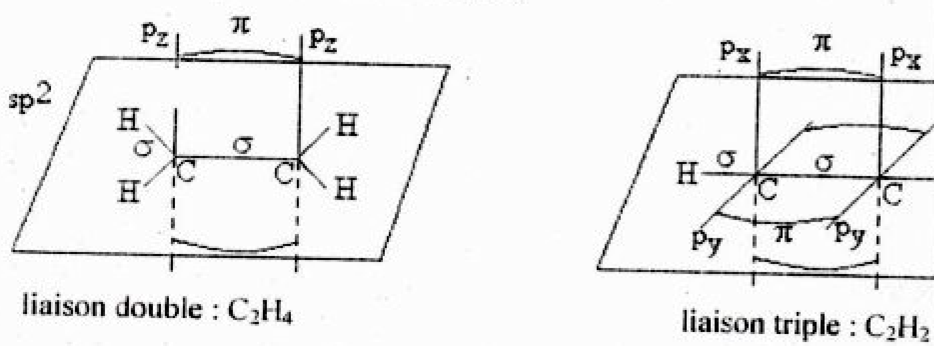
$2s^2$ $2p^2$ —hybridation sp3→ sp3 sp3 sp3 sp3

Un recouvrement axial s'établit entre une OA hybride et une OA 1s de l'hydrogène, donnant 4 liaisons σ identiques. La répulsion entre ces liaisons est minimale.



I- 4- Hybridation et liaison multiples

L'hybridation sp donne lieu à une liaison triple, la liaison double est obtenue à partir de sp^2. sp^3 ne donne que des liaisons simples.



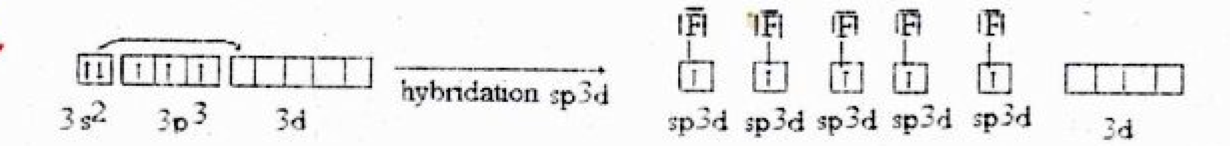
liaison double : C_2H_4

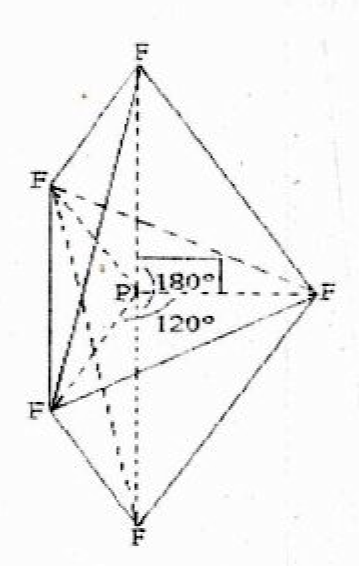
liaison triple : C_2H_2

I-5- Autres type d'hybridation

Ce type d'hybridation, tel que sp^{3}d, sp^{3}d^2,..., faisant intervenir les OA d, permet d'expliquer l'existence de certaines molécules.

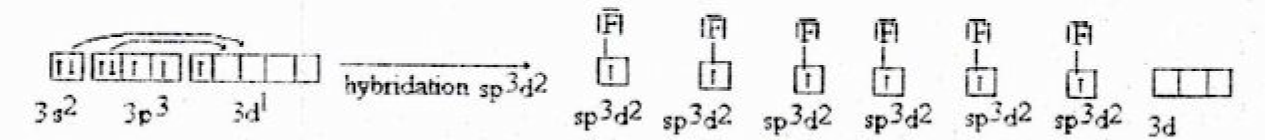
PF_5 : hybridation sp^{3}d.

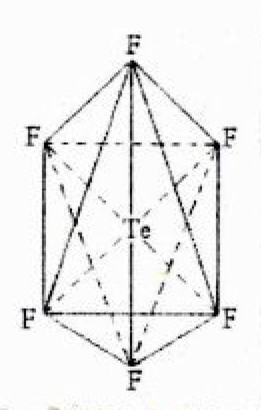




bipyramide à base triangulaire

TeF_6 : hybridation sp^3d^2.





Octaedre(bipyramide à base carrée)

II- Géométrie moléculaire

La structure géométrique d'une molécule dépend essentiellement des forces de liaisons covalentes agissant entre ses atomes. Ces atomes s'arrangent dans l'espace de manière à réduire au maximum possible les répulsions électrostatiques entre les électrons des atomes non liés de cette molécule et entre ceux du même atome. La géométrie adoptée par de nombreuses molécules peut être prévue et expliquée par la théorie de Gillespie, fondées sur le




ETUSUP.com